nベクトル模型の対相関関数に対する方程式(強い相関をもつゆらぎの統計物理学(第2回),科研費研究会報告)

阿部, 龍蔵

nベクトル模型の対相関関数に対する方程式

東大教養　阿部龍蔵

対相関関数は，静的にせよ動的にせよ，統計物理学で重要な役割を演じる。古典液体の静的対相関関数を求めるための伝統的な方法は，Kirkwood，Yvon－Born－Green などの積分方程式法である。ここでは対相関関数に対する方程式中に現れる3体相関関数を適当な近似（例えばKirkwood の重ね合わせ近似）により対相関関数で表現し方程式を閉じさせる。最近，一般化されたnベクトル模型の場合，なんらの近似なしに対相関関数に対する一つの閉じた方程式を導いたので，それについて報告したい。

通常，nベクトル模型の分配関数 Z は

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{m\alpha} d\sigma_m(\alpha) \exp\left[\frac{1}{2}\sum_{\ell m \alpha} K_{\ell m}\sigma_\ell(\alpha)\,\sigma_m(\alpha)\right] \prod_m \delta\left[n - \sum_\alpha \sigma_m^2(\alpha)\right] \qquad (1)$$

と表される。ここで $K_{\ell m}$ は格子点 ℓ, m 間の交換相互作用 $J_{\ell m}$ を kT（k：ボルツマン定数，T：絶対温度）で割ったもの，$\alpha = 1, 2, \cdots, n$ はスピン成分を表す記号で，(1) ではすべてのスピンが長さ $n^{1/2}$ をもつと仮定されている。この模型の対相関関数に対する閉じた方程式系を導出するのは至難の技である。そこで (1) を一般化し，m番目のスピンは長さ $n_m^{1/2}$ をもつとし，$n_1, n_2, \cdots, n_N$ を独立変数として取扱う。（概念的には Dirac の多時間理論に似ている。）統計力学的平均を《　》で記すと，対相関関数は

$$G_{jk} = \langle\!\langle \sigma_j(1)\,\sigma_k(1) \rangle\!\rangle = \langle\!\langle \sigma_j\,\sigma_k \rangle\!\rangle \qquad (2)$$

で与えられる。

(1) 中のデルタ関数を複素積分で表し，次の t 平均

$$\langle \cdots \rangle = \frac{\int \prod_m dt_m \cdots \exp\left(\sum_m n_m t_m\right) f^n}{\int \prod_m dt_m \exp\left(\sum_m n_m t_m\right) f^n} \qquad (3)$$

を導入する。ただし

$$f = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_m d\sigma_m \; e^{\mathcal{H}}, \qquad (4)$$

$$\mathcal{H} = -\sum_m t_m \sigma_m^2 + \frac{1}{2}\sum_{\ell m} K_{\ell m}\sigma_\ell\sigma_m . \qquad (5)$$

また，σ 平均を

$$\overline{\cdots} = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_m d\sigma_m \cdots e^{\mathcal{H}} \Big/ \int_{-\infty}^{\infty} \prod_m d\sigma_m \, e^{\mathcal{H}} \tag{6}$$

で定義する。(2)～(6) を用いると

$$\langle\!\langle \sigma_j \sigma_k \rangle\!\rangle = \langle \overline{\sigma_j \sigma_k} \rangle \tag{7}$$

がえられる。すなわち，対相関関数 G_{jk} は変数 $\sigma_j \sigma_k$ を σ 平均したもののt平均に等しい。σ 平均に対し部分積分を利用すると

$$2 \langle t_j \overline{\sigma_j \sigma_k} \rangle - \sum_{\ell} K_{j\ell} \langle \overline{\sigma_\ell \sigma_k} \rangle = \delta_{jk} \tag{8}$$

が導かれる。

(8) では新たな関数 $\langle t_j \overline{\sigma_j \sigma_k} \rangle$ が現れるが

$$\frac{\partial}{\partial n_j} \langle \overline{\sigma_j \sigma_k} \rangle = \langle t_j \overline{\sigma_j \sigma_k} \rangle - \langle \overline{\sigma_j \sigma_k} \rangle \langle t_j \rangle \tag{9}$$

に注意し， t積分に関する部分積分を使うと

$$\langle t_j \rangle = -\frac{1}{n_j} + \frac{n}{n_j} \langle t_j \overline{\sigma_j^2} \rangle \tag{10}$$

となる。(8)～(10) から

$$2 \frac{\partial G_{jk}}{\partial n_j} + \frac{n-2}{n_j} G_{jk} + \frac{n}{n_j} \left(\sum_{\ell} K_{j\ell} G_{\ell j} \right) G_{jk} - \sum_{\ell} K_{j\ell} G_{\ell k} = \delta_{jk} \tag{11}$$

という対相関関数に対する閉じた方程式がえられる。(11) を解くさい初期条件が必要だが，それは

$$G_{jk} = 0 \, , \quad (n_j = 0) \tag{12}$$

で与えられる。

(11) の1解法として高温展開を考え

$$G_{jk} = G_{jk}^{(0)} + G_{jk}^{(1)} + G_{jk}^{(2)} + \cdots \tag{13}$$

と表す。ただし， $G_{jk}^{(m)}$ は K^m のオーダーの項である。第0近似 $G_{jk}^{(0)}$ に対する方程式は

$$2 \frac{\partial G_{jk}^{(0)}}{\partial n_j} + \frac{n-2}{n_j} G_{jk}^{(0)} = \delta_{jk} \tag{14}$$

となり，$G_{jk}^{(0)}$ を

$$G_{jk}^{(0)} = A_{jk}^{(0)} n_j^{(2-n)/2} \tag{15}$$

と書けば，次の方程式

$$\frac{\partial A_{jk}^{(0)}}{\partial n_j} = \frac{1}{2} n_j^{(n-2)/2} \delta_{jk} \tag{16}$$

がえられる。(15)から，$n \geqq 2$ の場合，$n_j = 0$ で $A_{jk}^{(0)} = 0$ であることがわかる。この初期条件で(16)を解くと

$$A_{jk}^{(0)} = n_j^{n/2} \delta_{jk} / n \tag{17}$$

すなわち

$$G_{jk}^{(0)} = (n_j / n)\, \delta_{jk} \tag{18}$$

と表される。このように，$n \geqq 2$ だと解は一義的に決まるが，$n < 2$ では任意定数の不定さが残る。しかし，$n \geqq 2$ での解を解析接続すれば この不定性は除去可能である。実際このような方法でイジング模型の高温展開を K^3 のオーダーまで確認できる。いまの場合，高温展開は本質的に iteration 法なので計算機による計算が有望であると期待している。